

## DAFTAR ISI

|                          |          |
|--------------------------|----------|
| ABSTRAK                  |          |
| .....                    |          |
| .....                    | i        |
| <i>ABSTRACT</i>          |          |
| .....                    |          |
| .....                    | ii       |
| KATA                     |          |
| PENGANTAR                |          |
| .....                    |          |
| .....                    | iii      |
| DAFTAR ISI               |          |
| .....                    |          |
| .....                    | v        |
| DAFTAR                   |          |
| GAMBAR                   |          |
| .....                    |          |
| .....                    | vii      |
| DAFTAR TABEL             |          |
| .....                    |          |
| .....                    | ix       |
| DAFTAR ISTILAH           |          |
| .....                    |          |
| .....                    | x        |
| <b>BAB I PENDAHULUAN</b> |          |
| 1.1 Latar                | Belakang |
| .....                    |          |
| .....                    | 1        |
| 1.2 Rumusan Masalah      |          |
| Penelitian               |          |

.....  
.....2

1.3 Ruang Lingkup Penelitian  
.....  
.....2

1.4 Tujuan Penelitian  
.....  
.....3

**BAB II TINJAUAN PUSTAKA**

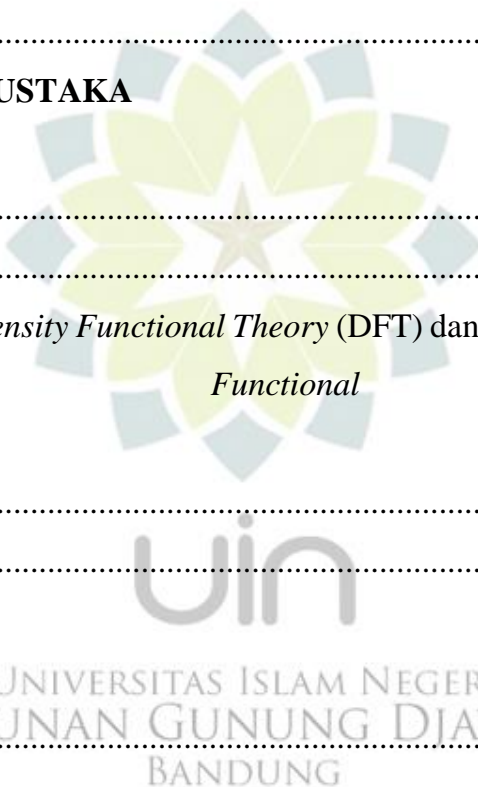
2.1 Kimia Komputasi  
.....  
.....4

2.2 Metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Time Dependent Density Functional Theory* (TDDFT).  
.....  
.....5

2.3 Energi Matahari  
.....  
.....6

2.4 Sel Surya  
.....  
.....7

2.5 *Dye Sensitized Solar Cells* (DSSC)  
.....  
.....7



|                                  |     |          |                   |
|----------------------------------|-----|----------|-------------------|
| 2.6 Organic Sensitizer           | Dye | Sebagai  | .....<br>..... 9  |
| 2.7 Titanium (TiO <sub>2</sub> ) |     | Dioksida | .....<br>..... 11 |

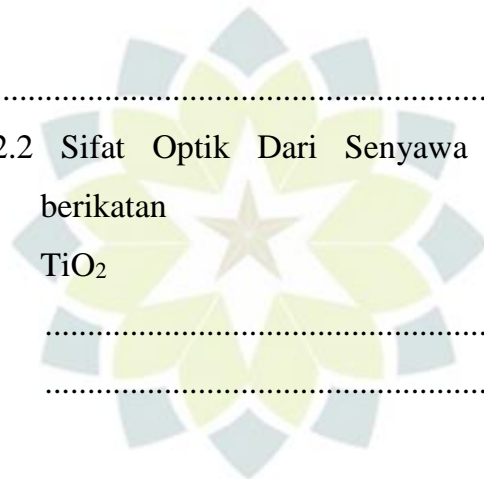
**BAB III METODOLOGI PENELITIAN**

|                       |         |                   |
|-----------------------|---------|-------------------|
| 3.1 Alat dan Model    | Molekul | .....<br>..... 13 |
| 3.1.1 Alat            |         | .....<br>..... 13 |
| 3.1.2 Model Molekul   |         | .....<br>..... 13 |
| 3.2 Metode Penelitian |         | .....<br>..... 13 |

**BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN**

|                                                                               |                   |
|-------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| 4.1 Studi Komputasi Senyawa Dopamin dan Dopamin yang terikat TiO <sub>2</sub> | .....<br>..... 17 |
|-------------------------------------------------------------------------------|-------------------|

|                                                                                                 |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 4.1.1 Metode DFT ( <i>Density Functional Theory</i> )                                           | 17 |
| 4.1.2 Metode TD-DFT ( <i>Time-dependent density functional theory</i> )                         | 19 |
| 4.1.2.1 Sifat Optik Dopamin Bebas                                                               | 19 |
| 4.1.2.2 Sifat Optik Dari Senyawa Dopamin yang berikatan dengan TiO <sub>2</sub>                 | 22 |
| 4.2 Studi Komputasi Senyawa Butil Katekol bebas dan Butil Katekol yang terikat TiO <sub>2</sub> | 26 |
| 4.2.1 Metode DFT ( <i>Density Functional Theory</i> )                                           | 26 |
| 4.2.2 Metode TD-DFT ( <i>Time-dependent density functional theory</i> )                         | 27 |
| 4.2.2.1 Sifat Optik Butil Katekol Bebas                                                         | 27 |



uin

UNIVERSITAS ISLAM NEGERI  
SUNAN GUNUNG DJATI  
BANDUNG

4.2.2.2 Sifat Optik Butil Katekol Yang Terikat TiO<sub>2</sub>

*Cluster*

|                                      |    |
|--------------------------------------|----|
| .....                                | 31 |
| 4.3 Diagram Energi                   |    |
| HOMO/LUMO                            |    |
| .....                                |    |
| .....                                | 35 |
| 4.4 Nilai Band Gap HOMO-LUMO Senyawa |    |
| <i>Dye</i>                           |    |
| .....                                |    |
| .....                                | 36 |
| <b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>    |    |
| 5.1 Kesimpulan                       |    |
| .....                                |    |
| .....                                | 38 |
| 5.2 Saran                            |    |
| .....                                |    |
| .....                                | 38 |
| <b>DAFTAR</b>                        |    |
| <b>PUSTAKA</b>                       |    |
| .....                                |    |
| .....                                | 39 |

## DAFTAR GAMBAR

|            |                  |                |              |
|------------|------------------|----------------|--------------|
| Gambar 2.1 | Struktur         | Dye-sensitized | Solar        |
|            | Cell             |                |              |
|            | .....            |                |              |
|            | .....            |                | 8            |
| Gambar 2.2 | Skema            | Kerja          | dari         |
|            | DSSC             |                |              |
|            | .....            |                |              |
|            | .....            |                | 9            |
| Gambar 2.3 | Struktur         |                | Senyawa      |
|            | Katekol          |                |              |
|            | .....            |                |              |
|            | .....            |                | 10           |
| Gambar 2.4 | Struktur         | Senyawa        | Butil        |
|            | Katekol          |                |              |
|            | .....            |                |              |
|            | .....            |                | 10           |
| Gambar 2.5 | Struktur         | Senyawa        | Butil        |
|            | TiO <sub>2</sub> | Katekol        | yang terikat |
|            | .....            |                |              |
|            | .....            |                | 10           |
| Gambar 2.6 | Struktur         |                | Senyawa      |
|            | Dopamin          |                |              |
|            | .....            |                |              |
|            | .....            |                | 11           |
| Gambar 2.7 | Struktur         | Senyawa        | Dopamin      |
|            | TiO <sub>2</sub> | yang terikat   |              |
|            | .....            |                |              |
|            | .....            |                | 11           |

|            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |    |
|------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Gambar 2.8 | Struktur kristal $\text{TiO}_2$ Anatase Cluster                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 12 |
| Gambar 2.9 | Struktur kristal $\text{TiO}_2$ Anatase                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 12 |
| Gambar 3.1 | Diagram Alir Studi Komputasi Senyawa Dopamin, Dopamin yang Berikatan dengan $\text{TiO}_2$ , Butil katekol, dan Butil katekol yang Berikatan dengan $\text{TiO}_2$ dengan Metode DFT dan TDDFT                                                                                                                                                                                                                                                  | 15 |
| Gambar 4.1 | Gambar geometri senyawa yang digambar dengan menggunakan perangkat lunak Avogadro (a) Butil katekol, (b) butil katekol yang berikatan dengan $\text{TiO}_2$ , (c) Dopamin, (d) Dopamin yang berikatan dengan $\text{TiO}_2$ .                                                                                                                                                                                                                   | 17 |
| Gambar 4.2 | Hasil Optimasi dari perangkat lunak menggunakan metode DFT (a) hasil optimasi senyawa Dopamin dengan menggunakan perangkat lunak Firefly, (b) hasil optimasi senyawa Dopamin dengan menggunakan perangkat lunak Gaussian, (c) hasil optimasi senyawa Dopamin yang terikat $\text{TiO}_2$ dengan menggunakan perangkat lunak Firefly, (d) hasil optimasi senyawa Dopamin yang terikat $\text{TiO}_2$ dengan menggunakan perangkat lunak Gaussian | 18 |

|            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |    |
|------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Gambar 4.3 | Spektrum UV-Vis dari senyawa dopamin bebas hasil perhitungan komputasi                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 19 |
| Gambar 4.4 | Diagram Penyebaran Elektron Hasil Perhitungan Senyawa Komputasi Senyawa Dopamin (a) Orbital L+1, (b) Orbital H-1, dan (c) orbital H-2                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 22 |
| Gambar 4.5 | Spektrum UV-Vis dari senyawa dopamin yang terikat TiO <sub>2</sub> Cluster hasil perhitungan komputasi.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 23 |
| Gambar 4.6 | Diagram Penyebaran Elektron Hasil Perhitungan Senyawa Komputasi Senyawa Dopamin yang terikat TiO <sub>2</sub> (a) Pada Orbital L+1, (b) Pada Orbital L, (c) pada orbital L+3, (d) pada orbital H-2, dan (e) pada orbital H-3                                                                                                                                                                                                                                                                    | 26 |
| Gambar 4.7 | Hasil Optimasi dari perangkat lunak dengan menggunakan metode DFT (a) hasil optimasi senyawa butil katekol bebas dengan menggunakan perangkat lunak Gaussian, (b) hasil optimasi senyawa butil katekol yang terikat TiO <sub>2</sub> dengan menggunakan perangkat lunak Gaussian, (c) hasil optimasi senyawa Butil katekol bebas dengan menggunakan perangkat lunak Firefly, (d) hasil optimasi senyawa Butil katekol yang terikat TiO <sub>2</sub> dengan menggunakan perangkat lunak Firefly. |    |



|             |                                                                                                                                                                                                                                                   |    |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             | 27 |
| Gambar 4.8  | spektrum UV-Vis dari senyawa butil katekol bebas hasil perhitungan komputasi                                                                                                                                                                      |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             | 28 |
| Gambar 4.9  | Diagram Penyebaran Elektron Hasil Perhitungan Senyawa Komputasi Senyawa Butil katekol (a) Pada Orbital L+1, (b) Pada Orbital H-1.                                                                                                                 |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             | 31 |
| Gambar 4.10 | spektrum UV-Vis dari senyawa butil katekol terikat TiO <sub>2</sub> Cluster hasil perhitungan komputasi.                                                                                                                                          |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             | 31 |
| Gambar 4.10 | Diagram Penyebaran Elektron Hasil Perhitungan Senyawa Komputasi Senyawa Butil katekol yang terikat TiO <sub>2</sub> (a) Pada Orbital H-2, (b) Pada Orbital H-1, (c) Pada Orbital H, (d) Pada Orbital L+3, dan (e) Pada Orbital L+4                |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             | 34 |
| Gambar 4.11 | Diagram Energi HOMO/LUMO Hasil perhitungan Firefly, (a) Senyawa Dopamin bebas, (b) Senyawa Dopamin yang Teradsorpsi pada TiO <sub>2</sub> , (c) Senyawa Butil Katekol bebas, dan (d) Senyawa Butil Katekol yang Teradsorpsi pada TiO <sub>2</sub> |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             |    |
|             | .....                                                                                                                                                                                                                                             | 35 |

Gambar 4.12 Diagram Energi HOMO/LUMO Hasil perhitungan Gaussian, (a) Senyawa Dopamin bebas, (b) Senyawa Dopamin yang Teradsorpsi pada  $\text{TiO}_2$ , (c) Senyawa Butil Katekol bebas, dan (d) Senyawa Butil Katekol yang Teradsorpsi pada  $\text{TiO}_2$ .

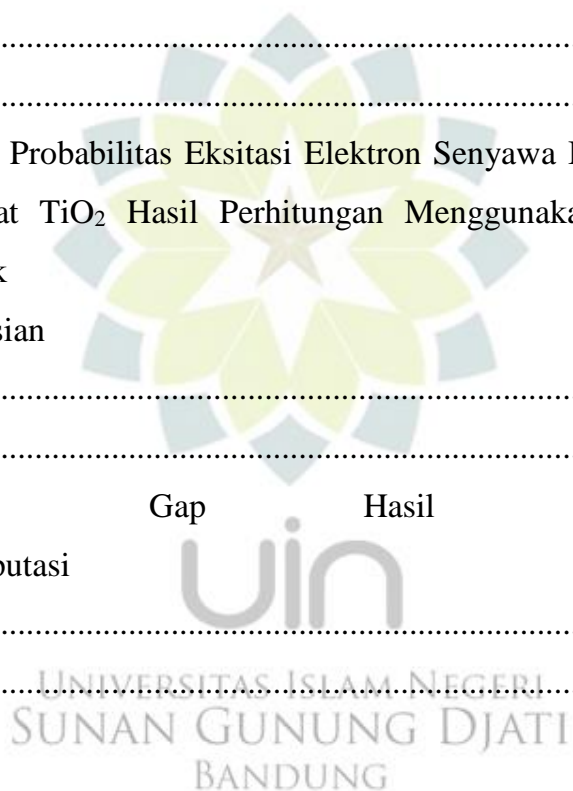
.....  
..... 36



## DAFTAR TABEL

|           |                                                                                                                                                                                        |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Tabel 2.1 | Sumber energi bagi Bumi dan proporsinya<br>.....<br>..... 7                                                                                                                            |
| Tabel 4.1 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Dopamin<br>Bebas Hasil Perhitungan Menggunakan Perangkat Lunak<br>Gaussian<br>.....<br>..... 20                                           |
| Tabel 4.2 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Dopamin<br>Bebas Hasil Perhitungan Menggunakan Perangkat Lunak<br>Firefly<br>.....<br>..... 21                                            |
| Tabel 4.3 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Dopamin Yang<br>Berikatan Dengan $\text{TiO}_2$ Cluster Hasil Perhitungan<br>Menggunakan Perangkat Lunak<br>Gaussian<br>.....<br>..... 24 |
| Tabel 4.4 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Dopamin Yang<br>Berikatan Dengan $\text{TiO}_2$ Cluster Hasil Perhitungan<br>Menggunakan Perangkat Lunak<br>Firefly<br>.....<br>..... 25  |
| Tabel 4.5 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Butil Katekol<br>Bebas Hasil Perhitungan Menggunakan Perangkat Lunak<br>Firefly<br>.....<br>..... 29                                      |

|           |                                                                                                                                            |    |
|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabel 4.6 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Butil Katekol Bebas Hasil Perhitungan Menggunakan Perangkat Lunak Gaussian                    | 30 |
| Tabel 4.7 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Butil Katekol Terikat TiO <sub>2</sub> Hasil Perhitungan Menggunakan Perangkat Lunak Firefly  | 32 |
| Tabel 4.8 | Tabel Probabilitas Eksitasi Elektron Senyawa Butil Katekol Terikat TiO <sub>2</sub> Hasil Perhitungan Menggunakan Perangkat Lunak Gaussian | 33 |
| Tabel 4.9 | Band Gap Hasil Perhitungan Komputasi                                                                                                       | 37 |



## DAFTAR ISTILAH

|                       |   |                                                                                                                                                                           |
|-----------------------|---|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>Band gap</i>       | = | Energi yang diperlukan oleh elektron untuk memecahkan ikatan kovalen sehingga dapat berpindah jalur dari jalur valensi ke jalur konduksi.                                 |
| <i>Cluster</i>        | = | Kesatuan atom yang terikat pada sebuah molekul                                                                                                                            |
| <i>Device</i>         | = | Alat                                                                                                                                                                      |
| DFT                   | = | <i>Dependent Functional Theory</i> , pendekatan perhitungan struktur elektron banyak partikel secara mekanika kuantum untuk sistem molekul dan material padat.            |
| DSSC                  | = | <i>Dye Sensitized Solar Cell</i> .                                                                                                                                        |
| DTCT                  | = | <i>Dye to TiO<sub>2</sub> Charge Transfer</i> , proses transfer muatan dari <i>dye</i> menuju TiO <sub>2</sub> .                                                          |
| <i>Dye</i>            | = | Zat warna, zat yang memiliki warna yang memiliki afinitas terhadap substrat yang digunakan.                                                                               |
| <i>Fotosensitizer</i> | = | Proses transfer energi dari cahaya yang terabsorpsi menuju reaktan.                                                                                                       |
| HTM                   | = | <i>Hole Transport Material</i> .                                                                                                                                          |
| <i>Interface</i>      | = | Penampang                                                                                                                                                                 |
| <i>Performance</i>    | = | Kemampuan                                                                                                                                                                 |
| <i>Photovoltaic</i>   | = | Alat yang bekerja berdasarkan pada konsep pemisahan muatan pada masing - masing <i>interface</i> dari kedua material yang berbeda mekanisme konduksinya.                  |
| Reaksi fusi           | = | Reaksi penggabungan dua inti atom yang ringan menjadi inti atom yang lebih berat disertai dengan pelepasan energi yang sangat besar.                                      |
| <i>Sensitizer</i>     | = | Senyawa kimia yang mampu memancarkan cahaya setelah mendapatkan energi dari sebuah molekul yang sebelumnya telah tereksitasi melalui reaksi kimia.                        |
| <i>Solar cell</i>     | = | Sebuah alat semikonduktor yang terdiri dari sebagian besar dioda p-n <i>junction</i> dan dengan adanya cahaya matahari mampu menghasilkan energi listrik                  |
| TDDFT                 | = | <i>Time Dependent Density Functional Theory</i> , teori mekanika kuantum yang digunakan dalam fisika dan kimia untuk mengamati sifat dan dinamika sistem banyak partikel. |